

02.09.2004

日 本 国 特 許 庁  
JAPAN PATENT OFFICE

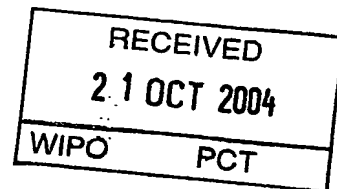
別紙添付の書類に記載されている事項は下記の出願書類に記載されている事項と同一であることを証明する。

This is to certify that the annexed is a true copy of the following application as filed with this Office.

出 願 年 月 日  
Date of Application: 2003年 9月30日

出 願 番 号  
Application Number: 特願2003-342605  
[ST. 10/C]: [JP2003-342605]

出 願 人  
Applicant(s): 富士通エフ・アイ・ピー株式会社

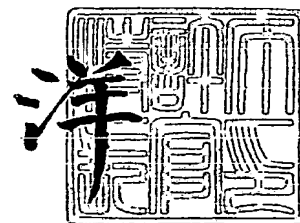


**PRIORITY  
DOCUMENT**  
SUBMITTED OR TRANSMITTED IN  
COMPLIANCE WITH RULE 17.1(a) OR (b)

2004年10月 8日

特許庁長官  
Commissioner,  
Japan Patent Office

小 川



【書類名】 特許願  
【整理番号】 JP4256FIP  
【あて先】 特許庁長官 殿  
【国際特許分類】 G01J 9/04  
【発明者】  
    【住所又は居所】 東京都江東区青海 2 丁目 4 5 番 富士通エフ・アイ・ピー株式会社  
社内  
    【氏名】 植村 暢之  
【特許出願人】  
    【識別番号】 591106864  
    【氏名又は名称】 富士通エフ・アイ・ピー株式会社  
【代理人】  
    【識別番号】 100109726  
    【弁理士】  
    【氏名又は名称】 園田 吉隆  
【選任した代理人】  
    【識別番号】 100101199  
    【弁理士】  
    【氏名又は名称】 小林 義教  
【手数料の表示】  
    【予納台帳番号】 058621  
    【納付金額】 21,000円  
【提出物件の目録】  
    【物件名】 特許請求の範囲 1  
    【物件名】 明細書 1  
    【物件名】 図面 1  
    【物件名】 要約書 1

**【書類名】 特許請求の範囲****【請求項 1】**

ライン・バイ・ライン計算に用いるフォークト関数の近似計算方法であって、該方法は

(1) フォークト関数の対象範囲を、フォークト関数のピーク近傍の第 1 の範囲および第 1 の範囲に含まれない裾部分に分けて、第 1 の範囲を 3 次関数で代替し、第 1 の所定の間隔ごとに該 3 次関数と裾部分のフォークト関数の値及び微分値を計算し、前記 3 次関数と前記フォークト関数の接続点において、両関数の値及び微分値を用いて接続する段階と、

(2) 複数の吸収線について前記 (1) の結果を足し合わせる段階と、

(3) 前記 (2) の結果を前記第 1 の所定の間隔より狭い間隔で、補間により関数値及び微分値を計算する段階と、

(4) 前記第 1 の範囲をピーク近傍の第 2 の範囲と第 2 の範囲に含まれない裾部分に分けて、「フォークト関数と前記 3 次関数の差の関数」の該第 2 の範囲を 3 次関数で代替し、第 2 の所定の間隔ごとに該 3 次関数と裾部分の該「フォークト関数と前記 3 次関数の差の関数」の値及び微分値を計算する段階と、

(5) 前記 3 次関数と前記「フォークト関数と前記 3 次関数の差の関数」の接続点において、両関数の値及び微分値を用いて接続する段階と、

(6) 複数の吸収線について前記 (4) 及び (5) の結果を前記 (3) の結果に足し合わせる段階と、

(7) 前記 (6) の結果を前記第 2 の所定の間隔より狭い間隔で、補間により関数値及び微分値を計算する段階と、

(8) 前記第 2 の範囲において複数の吸収線について「フォークト関数と前記 3 次関数の差の関数」の値を前記 (7) の結果に足し合わせる段階と、  
を有する方法。

**【請求項 2】**

(9) 最小単位の間隔になるまで間隔を狭めながら補間により関数値、微分値を計算する段階を繰り返す請求項 1 に記載の方法。

**【請求項 3】**

第 3 の所定の間隔になるまで前記 (4) ないし (7) に記載された段階を 1 回以上繰り返す請求項 1 に記載の方法。

**【請求項 4】**

前記所定の間隔は以下の式を用いて決定する請求項 1 に記載の方法。

最も広い幅のサブ関数に対する第 1 の所定の間隔は、 $j^{k_{\max}} d\nu$  である。ここで、 $j$  は 1 桁の自然数、 $d\nu$  は波数の増分、 $k_{\max}$  は、 $j^{k_{\max}+2} p d\nu \leq V_{\max}$  を満たす自然数である。ただし、 $V_{\max}$  は吸収線中心からの計算範囲で最大のもの、 $p$  は計算精度を制御する自然数である。

**【請求項 5】**

前記所定の間隔は以下の式を用いて決定する請求項 3 に記載の方法。

前記最も詳細な第 3 の所定の間隔は、 $j^{k_{\min}} d\nu$  である。ここで、 $j$  は 1 桁の自然数、 $d\nu$  は波数の増分、 $k_{\min}$  は、 $j^{k_{\min}} p d\nu \leq \alpha$  ( $\alpha$  は  $\gamma/4$  程度) を満たす最大の非負の整数である。ただし、 $\gamma$  は吸収線の半値幅の近似値、 $p$  は計算精度を制御する自然数である。

**【請求項 6】**

前記第 2 の所定の間隔は以下の式を用いて決定する請求項 1 に記載の方法。

第  $k - k_{\min} + 1$  番目に狭い幅のサブ関数に対して所定の間隔は、 $j^k d\nu$  である。ここで、 $j$  は 1 桁の自然数、 $d\nu$  は波数の増分、 $k$  は  $k_{\min} \leq k < k_{\max}$  である。

**【請求項 7】**

前記補間は、 $j$  を 4 として補間区間 ( $x_0$ 、 $x_1$ ) において  $x_0$ 、 $x_1$  での関数値  $y_0$ 、 $y_1$  及び関数微分値  $y_0'$ 、 $y_1'$  を用いて、以下の (1) 式は関数値の補間式、(2) 式

は関数微分値の補間式、 $\varepsilon$  を非負の小数として計算する請求項 1 ないし 3 のいずれかに記載の方法。

$$\begin{pmatrix} y_a \\ y_b \\ y_c \end{pmatrix} = \frac{1}{64} \begin{pmatrix} 54-6\varepsilon & 10+6\varepsilon & 9(1-\varepsilon) & -3(1-\varepsilon) \\ 32 & 32 & 8(1-\varepsilon) & -8(1-\varepsilon) \\ 10+6\varepsilon & 54-6\varepsilon & 3(1-\varepsilon) & -9(1-\varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1-x_0)y'_0 \\ (x_1-x_0)y'_1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

$$\begin{pmatrix} y'_a \\ y'_b \\ y'_c \end{pmatrix} = \frac{1}{16(x_1-x_0)} \begin{pmatrix} -18+2\varepsilon & 18-2\varepsilon & 3(1-\varepsilon) & -5(1-\varepsilon) \\ -24+8\varepsilon & 24-8\varepsilon & -4(1-\varepsilon) & -4(1-\varepsilon) \\ -18+2\varepsilon & 18-2\varepsilon & -5(1-\varepsilon) & 3(1-\varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1-x_0)y'_0 \\ (x_1-x_0)y'_1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

【請求項 8】

前記補間は、 $j$  を 5 として補間区間  $(x_0, x_1)$  において  $x_0$ 、 $x_1$  での関数値  $y_0$ 、 $y_1$  及び関数微分値  $y'_0$ 、 $y'_1$  を用いて、以下の(3)式は関数値の補間式、(4)式は関数微分値の補間式、 $\varepsilon$  を非負の小数として計算する請求項 1 ないし 3 のいずれかに記載の方法。

$$\begin{pmatrix} y_a \\ y_b \\ y_c \\ y_d \end{pmatrix} = \frac{1}{125} \begin{pmatrix} 112-12\varepsilon & 13+12\varepsilon & 16(1-\varepsilon) & -4(1-\varepsilon) \\ 81-6\varepsilon & 44+6\varepsilon & 18(1-\varepsilon) & -12(1-\varepsilon) \\ 44+6\varepsilon & 81-6\varepsilon & 12(1-\varepsilon) & -18(1-\varepsilon) \\ 13+12\varepsilon & 112-12\varepsilon & 4(1-\varepsilon) & -16(1-\varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1-x_0)y'_0 \\ (x_1-x_0)y'_1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$\begin{pmatrix} y'_a \\ y'_b \\ y'_c \\ y'_d \end{pmatrix} = \frac{1}{25(x_1-x_0)} \begin{pmatrix} -24-\varepsilon & 24+\varepsilon & 8(1-\varepsilon) & -7(1-\varepsilon) \\ -36+11\varepsilon & 36-11\varepsilon & -3(1-\varepsilon) & -8(1-\varepsilon) \\ -36+11\varepsilon & 36-11\varepsilon & -8(1-\varepsilon) & -3(1-\varepsilon) \\ -24-\varepsilon & 24+\varepsilon & -7(1-\varepsilon) & 8(1-\varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1-x_0)y'_0 \\ (x_1-x_0)y'_1 \end{pmatrix} \quad (4)$$

【請求項 9】

フォークト関数を  $K(x, y)$  とし、吸収線のフォークト線形からのずれが  $K(x, y) + f(x)$  であるとき、

$$K(x, y)$$

を

$$\tilde{K}(x, y) = AK(x, y) + Bf(x)、$$

、

$$\frac{\partial K(x, y)}{\partial x}$$

を

$$\frac{\partial \tilde{K}(x, y)}{\partial x} = A \frac{\partial K(x, y)}{\partial x} + B \frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

で置き換えることによって高速化する請求項 1 ないし 8 に記載の方法。

【請求項 10】

フォークト関数を  $K(x, y)$  とし、吸収線のフォークト線形からのずれ  $K(x, y) f(x)$  がであるとき、

$$K(x, y)$$

を

$$\tilde{K}(x, y) = K(x, y) f(x)、$$

$$\frac{\partial K(x, y)}{\partial x}$$

を

$$\frac{\partial \tilde{K}(x, y)}{\partial x} = \frac{\partial K(x, y)}{\partial x} f(x) + K(x, y) \frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

で置き換えることによって高速化する請求項 1 ないし 8 に記載の方法。

【請求項 11】

サブローレンツィアン補正について、

$$\tilde{K}(x, y) = K(x, y) A \exp(-B |x|)、$$

および

$$\frac{\partial \tilde{K}(x, y)}{\partial x} = \frac{\partial K(x, y)}{\partial x} A \exp(-B |x|) + K(x, y) [-\operatorname{sgn}(x) A B \exp(-B |x|)]$$

を利用して高速化する請求項 1 ないし 10 に記載の方法。

【請求項 12】

ラインミキシング補正について、以下に表す式で置き換えることによって高速化する請求項 1 ないし 10 に記載の方法。

$$K(x, y)$$

を

$$\tilde{K}(x, y) = A K(x, y) + B L(x, y)、$$

$$\frac{\partial K(x, y)}{\partial x}$$

を

$$\frac{\partial \tilde{K}(x, y)}{\partial x} = -2 \left[ (Ax + By)K(x, y) - (Ay - Bx)L(x, y) - \frac{B}{\sqrt{\pi}} \right],$$

ここで  $L(x, y)$  は次式で定義される、複素数  $z = x + iy$  の関数  $w(z)$  の虚数成分である（実数部分はフォークト関数）。

$$w(z) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-t^2)}{z - t} dt = \exp(-z^2) \operatorname{erfc}(-iz) = K(x, y) + iL(x, y)$$

( $\operatorname{erfc}(z)$  は複素相補誤差関数)

【請求項 13】

ライン・バイ・ライン計算に用いるフォークト関数の近似計算プログラムであって、該プログラムは、

(1) フォークト関数の対象範囲を、フォークト関数のピーク近傍の第1の範囲および第1の範囲に含まれない裾部分に分けて、第1の範囲を3次関数で代替し、第1の所定の間隔ごとに該3次関数と裾部分のフォークト関数の値及び微分値を計算し、前記3次関数と前記フォークト関数の接続点において、両関数の値及び微分値を用いて接続する段階と、

(2) 複数の吸収線について前記(1)の結果を足し合わせる段階と、

(3) 前記(2)の結果を前記第1の所定の間隔より狭い間隔で、補間により関数値及び微分値を計算する段階と、

(4) 前記第1の範囲をピーク近傍の第2の範囲と第2の範囲に含まれない裾部分に分けて、「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の該第2の範囲を3次関数で代替し、第2の所定の間隔ごとに該3次関数と裾部分の該「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の値及び微分値を計算する段階と、

(5) 前記3次関数と前記「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の接続点において、両関数の値及び微分値を用いて接続する段階と、

(6) 複数の吸収線について前記(4)及び(5)の結果を前記(3)の結果に足し合わせる段階と、

(7) 前記(6)の結果を前記第2の所定の間隔より狭い間隔で、補間により関数値及び微分値を計算する段階と、

(8) 前記第2の範囲において複数の吸収線について「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の値を前記(7)の結果に足し合わせる段階と、  
を有するプログラム。

【請求項 14】

最小単位の間隔になるまで間隔を狭めながら補間により関数値、微分値を計算する段階を繰り返す請求項13に記載のプログラム。

【請求項 15】

第3の所定の間隔になるまで前記(4)ないし(7)に記載された段階を1回以上繰り返す請求項13に記載のプログラム。

## 【書類名】明細書

【発明の名称】フォークト線形の分解による高速ライン・バイ・ライン計算方法およびプログラム

## 【技術分野】

【0001】

本発明は大気の観測において、気体分子の吸収係数スペクトルの高速ライン・バイ・ライン計算に関する。

## 【背景技術】

【0002】

地球の大気は太陽からの電磁波を受ける一方で、自身も赤外領域を中心とする電磁波を宇宙空間に放出している。そして、これらの電磁波は大気に含まれる気体分子や雲、エアロゾルなどにより吸収、放射、散乱などの相互作用を受ける。こうした大気との相互作用によってもたらされる電磁波のスペクトル分布の変化（これを理論的に求める計算を放射伝達計算という）を地上、航空機、あるいは人工衛星に搭載されたセンサで測定することにより、気温、気圧や微量な気体成分の濃度などを分析することができる。

【0003】

大気の放射伝達計算ではライン・バイ・ライン計算と呼ばれる手法が用いられているが、ライン・バイ・ライン計算は計算量が膨大である。このため、計算時間が非常に長くパーソナルコンピュータ等で広いスペクトル範囲にわたって高速に計算することは実質的に困難である。また、このような問題を回避する方法としてテーブルルックアップなどを利用して事前にライン・バイ・ライン計算を行ったデータを利用する方法があるが、これは大容量データファイルを必要とする欠点を有していた。また事前計算を必要としない他のアルゴリズムでもライン・バイ・ライン計算の20倍程度の計算速度にとどまっていた。

【非特許文献1】 Akihiro Uchiyama, "Line-By-Line Computation Of The Atmospheric Absorption Spectrum Using The Decomposed VOIGT Line Shape" J. Quant. Spectrosc. Radiant. Transfer Vol. 47, No6, pp.521-532, 1992.

## 【発明の開示】

## 【発明が解決しようとする課題】

【0004】

上述のような問題から、高速でライン・バイ・ライン計算ができる計算方法が望まれており、本発明はこのような計算方法およびプログラムを提供する。

## 【課題を解決するための手段】

【0005】

本発明はライン・バイ・ライン計算に用いるフォークト関数の近似計算方法であって、該方法は、以下の各段階を含む。

(1) フォークト関数の対象範囲を、フォークト関数のピーク近傍の第1の範囲および第1の範囲に含まれない裾部分に分けて、第1の範囲を3次関数で代替し、第1の所定の間隔ごとに該3次関数と裾部分のフォークト関数の値及び微分値を計算し、前記3次関数と前記フォークト関数の接続点において、両関数の値及び微分値を用いて接続する段階と、

(2) 複数の吸収線について前記(1)の結果を足し合わせる段階と、

(3) 前記(2)の結果を前記第1の所定の間隔より狭い間隔で、補間により関数値及び微分値を計算する段階と、

(4) 前記第1の範囲をピーク近傍の第2の範囲と第2の範囲に含まれない裾部分に分けて、「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の該第2の範囲を3次関数で代替し、第2の所定の間隔ごとに該3次関数と裾部分の該「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の値及び微分値を計算する段階と、

(5) 前記3次関数と前記「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の接続点において、両関数の値及び微分値を用いて接続する段階と、

(6) 複数の吸収線について前記(4)及び(5)の結果を前記(3)の結果に足し合わ

せる段階と、

(7) 前記(6)の結果を前記第2の所定の間隔より狭い間隔で、補間により関数値及び微分値を計算する段階と、

(8) 前記第2の範囲において複数の吸収線について「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の値を前記(7)の結果に足し合わせる段階。

以上の段階を用いる方法により、フォークト関数を3次関数を用いて高速に計算することができる。

#### 【0006】

これに加えて第3の所定の間隔になるまで前記(5)ないし(8)に記載された段階を1回以上繰り返すこともできる。これによって計算間隔の小さい詳細な結果を得ることができる。このような第1～第3の所定の間隔は以下のように求める。

#### 【0007】

最も広い幅のサブ関数に対する第1の所定の間隔は、 $j^{k_{\max}} d\nu$ である。ここで、 $j$ は所定の間隔に分割にするときの所定の分割数であり、1桁の自然数、 $d\nu$ は波数の増分、 $k_{\max}$ は $j^{k_{\max}+2} p d\nu \leq V_{\max}$ を満たす自然数である。ただし、 $V_{\max}$ は吸収線中心からの計算範囲、 $p$ は計算精度を制御する自然数( $p=1, 2, 3$ )である。

最も詳細な第3の所定の間隔は、 $j^{k_{\min}} d\nu$ である。ここで、 $j$ は1桁の自然数であり2～6程度の値である。 $d\nu$ は波数の増分、 $k_{\min}$ は、 $j^{k_{\min}} p d\nu \leq \alpha$  ( $\alpha$ は $\gamma/4$ 程度)を満たす最大の非負の整数である(存在しない場合は0とする)。ただし、 $\gamma$ は吸収線の半値幅の近似値、 $p$ は計算精度を制御する自然数( $p=1, 2, 3$ )である。

第2の所定の間隔は以下の式を用いて決定する請求項1ないし4のいずれかに記載の方法。

第 $k - k_{\min} + 1$ 番目に狭い幅のサブ関数に対して所定の間隔は、 $j^k d\nu$ である。ここで、 $j$ は1桁の自然数、 $d\nu$ は波数の増分、 $k$ は $k_{\min} \leq k < k_{\max}$ である。

#### 【0008】

4分割の補間に関しては、前記補間は、 $j$ を4とし、補間区間( $x_0$ 、 $x_1$ )において $x_0$ 、 $x_1$ での関数値 $y_0$ 、 $y_1$ 及び関数微分値 $y'_0$ 、 $y'_1$ 、以下の(1)式は関数値の補間式、(2)式は関数微分値の補間式を用いて、 $\varepsilon$ を非負の小数として計算する

#### 【数1】

$$\begin{pmatrix} y_a \\ y_b \\ y_c \end{pmatrix} = \frac{1}{64} \begin{pmatrix} 54-6\varepsilon & 10+6\varepsilon & 9(1-\varepsilon) & -3(1-\varepsilon) \\ 32 & 32 & 8(1-\varepsilon) & -8(1-\varepsilon) \\ 10+6\varepsilon & 54-6\varepsilon & 3(1-\varepsilon) & -9(1-\varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1-x_0)y'_0 \\ (x_1-x_0)y'_1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

#### 【数2】

$$\begin{pmatrix} y'_a \\ y'_b \\ y'_c \end{pmatrix} = \frac{1}{16(x_1-x_0)} \begin{pmatrix} -18+2\varepsilon & 18-2\varepsilon & 3(1-\varepsilon) & -5(1-\varepsilon) \\ -24+8\varepsilon & 24-8\varepsilon & -4(1-\varepsilon) & -4(1-\varepsilon) \\ -18+2\varepsilon & 18-2\varepsilon & -5(1-\varepsilon) & 3(1-\varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1-x_0)y'_0 \\ (x_1-x_0)y'_1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

#### 【0009】

また5分割の補間に関しては、 $j$ を5とし、補間区間( $x_0$ 、 $x_1$ )において $x_0$ 、 $x_1$ での関数値 $y_0$ 、 $y_1$ 及び関数微分値 $y'_0$ 、 $y'_1$ 、以下の(3)式は関数値の補間式、(4)式は関数微分値の補間式を用いて、 $\varepsilon$ を非負の小数として計算する。



【数 3】

$$\begin{pmatrix} y_a \\ y_b \\ y_c \\ y_d \end{pmatrix} = \frac{1}{125} \begin{pmatrix} 112-12\varepsilon & 13+12\varepsilon & 16(1-\varepsilon) & -4(1-\varepsilon) \\ 81-6\varepsilon & 44+6\varepsilon & 18(1-\varepsilon) & -12(1-\varepsilon) \\ 44+6\varepsilon & 81-6\varepsilon & 12(1-\varepsilon) & -18(1-\varepsilon) \\ 13+12\varepsilon & 112-12\varepsilon & 4(1-\varepsilon) & -16(1-\varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1-x_0)y'_0 \\ (x_1-x_0)y'_1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

【数 4】

$$\begin{pmatrix} y'_a \\ y'_b \\ y'_c \\ y'_d \end{pmatrix} = \frac{1}{25(x_1-x_0)} \begin{pmatrix} -24-\varepsilon & 24+\varepsilon & 8(1-\varepsilon) & -7(1-\varepsilon) \\ -36+11\varepsilon & 36-11\varepsilon & -3(1-\varepsilon) & -8(1-\varepsilon) \\ -36+11\varepsilon & 36-11\varepsilon & -8(1-\varepsilon) & -3(1-\varepsilon) \\ -24-\varepsilon & 24+\varepsilon & -7(1-\varepsilon) & 8(1-\varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1-x_0)y'_0 \\ (x_1-x_0)y'_1 \end{pmatrix} \quad (4)$$

このような計算によって高速に補間ができる。

【0010】

またフォークト関数を  $K(x, y)$  とし、吸収線のフォークト線形からのずれが  $K(x, y) + f(x)$  であるとき、

【数 5】

$$\tilde{K}(x, y) = AK(x, y) + Bf(x),$$

【数 6】

$$\frac{\partial K(x, y)}{\partial x}$$

で置き換えることによって高速化する方法を提供する。

【0011】

さらに、フォークト線形からのずれが  $K(x, y)f(x)$  の形であるとき、

【数 7】

$$\tilde{K}(x, y) = K(x, y)f(x),$$

【数 8】

$$\frac{\partial \tilde{K}(x, y)}{\partial x} = \frac{\partial K(x, y)}{\partial x} f(x) + K(x, y) \frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

で置き換えることによって高速化する方法を提供する。

【0012】

さらにラインミキシング補正では、

【数 9】

$$\tilde{K}(x, y) = AK(x, y) + BL(x, y),$$

## 【数 10】

$$\frac{\partial \tilde{K}(x, y)}{\partial x} = -2 \left[ (Ax + By)K(x, y) - (Ay - Bx)L(x, y) - \frac{B}{\sqrt{\pi}} \right],$$

ここで  $L(x, y)$  は次式で定義される、複素数  $z = x + iy$  の関数  $w(z)$  の虚数成分である（実数部分はフォークト関数）。

## 【数 11】

$$w(z) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-t^2)}{z - t} dt = \exp(-z^2) \operatorname{erfc}(-iz) = K(x, y) + iL(x, y)$$

( $\operatorname{erfc}(z)$  は複素相補誤差関数)

で置き換えることによる高速計算方法を提供する。

## 【0013】

さらにこれら上記記載の方法をプログラムとして実装することによって本発明の方法を実行する装置を提供することができる。

【発明を実施するための最良の形態】

## 【0014】

以下に本発明の実施例を説明する。図1はフォークト関数1の形を示した図である。本発明ではまずこのフォークト関数1をサブ関数に分ける。該サブ関数はピーク近傍の第1の範囲2と該第1の範囲2以外の裾部分3であり、該第1の範囲1を3次関数で代替し、該第1の範囲に含まれない部分、つまり裾部分をフォークト関数で計算する。

## 【0015】

図2に詳細な計算方法を示した。図2(a)に示したようにフォークト関数1のうち第1の範囲2に含まれる関数4を3次関数で代替する。このとき3次関数とフォークト関数の接続点における両関数の微分値が一致し滑らかに接続するよう3次関数を決定する。また該第1の範囲に含まれない部分5はフォークト関数で計算する。計算は第1の所定の間隔で行い、これは波数の増分を  $d\nu$  として、 $j^{\max} d\nu$  である。ここで  $j$  は1桁の自然数、 $k_{\max}$  は、 $j^{\max} + 2 \quad p \, d\nu \leq V_{\max}$  を満たす最大の自然数である。 $V_{\max}$  は例えば  $25 \text{ cm}^{-1}$  を利用する。また、通常  $j$  は2～6程度の数値が与えられ、好適な値は4である。また  $V_{\max}$  は吸収線中心からの計算範囲、 $p$  は計算精度を制御する自然数であり、好適には  $p$  の値は1、2、3である。

## 【0016】

このようにして計算した結果を複数の吸収線について足し合わせる。この段階では第1の所定の間隔で計算した粗い結果となっている。

## 【0017】

次に第1の所定の間隔より小さい間隔で未評価点を計算する。つまり第1の所定の間隔を4分割する間隔で未評価点の補間を行う。この分割点の計算は以下の補間式によって行う。

補間区間  $(x_0, x_1)$  において  $x_0, x_1$  での関数値を  $y_0, y_1$  及び関数微分値  $y_0', y_1'$  をとして以下の2つの式、

## 【数 12】

$$\begin{pmatrix} y_a \\ y_b \\ y_c \end{pmatrix} = \frac{1}{64} \begin{pmatrix} 54-6\varepsilon & 10+6\varepsilon & 9(1-\varepsilon) & -3(1-\varepsilon) \\ 32 & 32 & 8(1-\varepsilon) & -8(1-\varepsilon) \\ 10+6\varepsilon & 54-6\varepsilon & 3(1-\varepsilon) & -9(1-\varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1-x_0)y_0' \\ (x_1-x_0)y_1' \end{pmatrix} \quad (1)$$

## 【数 13】

$$\begin{pmatrix} y'_a \\ y'_b \\ y'_c \end{pmatrix} = \frac{1}{16(x_1 - x_0)} \begin{pmatrix} -18+2\varepsilon & 18-2\varepsilon & 3(1-\varepsilon) & -5(1-\varepsilon) \\ -24+8\varepsilon & 24-8\varepsilon & -4(1-\varepsilon) & -4(1-\varepsilon) \\ -18+2\varepsilon & 18-2\varepsilon & -5(1-\varepsilon) & 3(1-\varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1 - x_0)y'_0 \\ (x_1 - x_0)y'_1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

により求める。ここで  $\varepsilon$  は非負の小数である。この  $\varepsilon$  に関しては、図 3 に示したようにフォークト関数と 3 次関数が補間点  $x_0$ 、 $x_1$  で一致しても、補間点の間の領域では曲線の曲率が異なるため関数値に誤差が生じる。 $\varepsilon = 0$  でも十分な精度が得られるが、3 次関数の曲率を  $\varepsilon$  の値を変化させることによって調節することにより誤差をさらに半分程度に抑えることが可能である。この 2 つの式により前記第 1 の所定の区間の補間区間 ( $x_0$ 、 $x_1$ ) を 4 分割する点の関数値  $y_a$ 、 $y_b$ 、 $y_c$ 、およびその微分値  $y'_a$ 、 $y'_b$ 、 $y'_c$  を求めることができる。ここで  $x_0$ 、 $x_1$  は本発明においては波数である。前記  $\varepsilon$  の調整は、計算スペクトル範囲のうちの一部の狭いスペクトル範囲において、 $\varepsilon$  を変化させた場合の計算結果を通常のライン・バイ・ライン法の計算結果と比較しておこなう。

## 【0018】

また前記第 1 の所定の区間を 5 分割する補間も本発明では提案する。5 分割する補間式は、

## 【数 14】

$$\begin{pmatrix} y_a \\ y_b \\ y_c \\ y_d \end{pmatrix} = \frac{1}{125} \begin{pmatrix} 112-12\varepsilon & 13+12\varepsilon & 16(1-\varepsilon) & -4(1-\varepsilon) \\ 81-6\varepsilon & 44+6\varepsilon & 18(1-\varepsilon) & -12(1-\varepsilon) \\ 44+6\varepsilon & 81-6\varepsilon & 12(1-\varepsilon) & -18(1-\varepsilon) \\ 13+12\varepsilon & 112-12\varepsilon & 4(1-\varepsilon) & -16(1-\varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1 - x_0)y'_0 \\ (x_1 - x_0)y'_1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

## 【数 15】

$$\begin{pmatrix} y'_a \\ y'_b \\ y'_c \\ y'_d \end{pmatrix} = \frac{1}{25(x_1 - x_0)} \begin{pmatrix} -24-\varepsilon & 24+\varepsilon & 8(1-\varepsilon) & -7(1-\varepsilon) \\ -36+11\varepsilon & 36-11\varepsilon & -3(1-\varepsilon) & -8(1-\varepsilon) \\ -36+11\varepsilon & 36-11\varepsilon & -8(1-\varepsilon) & -3(1-\varepsilon) \\ -24-\varepsilon & 24+\varepsilon & -7(1-\varepsilon) & 8(1-\varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1 - x_0)y'_0 \\ (x_1 - x_0)y'_1 \end{pmatrix} \quad (4)$$

である。式の中の各文字は前記 4 分割の場合と同様である。また  $y_d$ 、 $y'_d$  はそれぞれ関数値および微分値であることは当業者には明らかである。ここで上記記載の補間式は第 1 の所定の区間だけでなく他の所定の区間に対しても用いることができ、これは当業者には明白である。

## 【0019】

以上のようにして各補間点を計算する。次に図 2 (b) に示したように前記第 1 の範囲内においてさらにピーク近傍の領域を補間により計算する。前記記載と同様に該第 1 の範囲内においてピーク近傍を第 2 の範囲 6 とし、該第 2 の範囲 6 に含まれない裾部分とに分け、第 2 の範囲を第 2 の 3 次関数で、該第 2 の範囲に含まれない裾部分を「フォークト関数と第 1 の 3 次関数との差の関数」7 でそれぞれ表す。該第 2 の 3 次関数は新たな 3 次関数と第 1 の 3 次関数の差の関数である。ここで該「フォークト関数と第 1 の 3 次関数との差の関数」を以後単に「差の関数」と称する。該第 2 の 3 次関数と「差の関数」7 の接続点では前記記載と同様に関数値および微分値が一致することを条件として接続する。

## 【0020】

このように関数を接続した後、第 2 の範囲において第 2 の所定の区間で関数値及び微分値を計算する。この第 2 の所定の区間は第 1 の所定の区間より狭い区間でありこれは以下の式によって計算される。

第  $k - k_{\min} + 1$  番目に狭い幅のサブ関数に対して所定の間隔は、 $j^k d\nu$  である。ここで、 $j$  は 1 桁の自然数、 $d\nu$  は波数の増分、 $k$  は  $k_{\min} \leq k < k_{\max}$  である。

またこの計算を全ての吸収線について行う。さらにこれら計算した各点間の補間を行う。補間は前記 (1) と (2) または (3) と (4) の式を用いる。

#### 【0021】

ここで、前記第 2 の範囲に含まれない裾部分の「差の関数」とこれに滑らかに接続する第 2 の範囲の 3 次関数を複数の吸収線について計算する方法を述べたがこの代わりに、第 2 の範囲に含まれない裾部分のフォークト関数とこれに滑らかに接続する 3 次関数を複数の吸収線について計算した後で第 1 の 3 次関数を第 1 の範囲全体から複数の吸収線について差し引く方法を用いることも可能である。

#### 【0022】

この第 2 の範囲に関しては所定の間隔に達するまで上記計算を繰り返すことができる。つまり第 2 の範囲を更にピーク近傍および裾部分に分割しそれぞれを 3 次関数、差の関数で計算した後接続し、第 2 の所定の間隔を計算する式の  $k$  を 1 つ増加させて計算しする。この計算を全ての吸収線について行い、これを図 2 (b) で計算した結果に足し合わせる。これを所定の間隔になるまで繰り返す。

#### 【0023】

さらにピーク近傍を 3 次関数で代替し、裾部分を「差の関数」として前記第 2 の間隔より狭い第 3 の所定の間隔で計算をする。該第 3 の所定の間隔は以下の式で表される。

第 3 の所定の間隔は、 $j^{k_{\min}} d\nu$  である。ここで、 $j$  は 1 桁の自然数、 $d\nu$  は波数の増分、 $k_{\min}$  は、 $j^{k_{\min}} p d\nu \leq \alpha$  を満たす最大の非負の小数である（存在しない場合は 0 とする）。ただし、 $\alpha$  は  $\gamma/4$  程度の値（ $\gamma$  は吸収線の半値幅の近似値）、 $p$  は計算精度を制御する自然数 ( $p=1, 2, 3$ ) である。

#### 【0024】

以上のような段階によってフォークト関数を精度良く、かつ高速に計算することができる。ここで実際の二酸化炭素等のフォークト関数と若干のずれが生じることが知られており、このずれに対して補正を行う方法が知られている。本発明の方法はこれらの補正に対しても適用できる。この補正に関して次に説明する。

#### 【0025】

一般的な線形補正を最初に説明する。

フォークト関数を  $K(x, y)$  と表わす。フォークト線形からのずれが  $K(x, y) + f(x)$  の形で表わされる場合、置き換える関数を、

#### 【数 16】

$$\tilde{K}(x, y)$$

として、

#### 【数 17】

$$\tilde{K}(x, y) = A K(x, y) + B f(x),$$

#### 【数 18】

$$\frac{\partial \tilde{K}(x, y)}{\partial x} = A \frac{\partial K(x, y)}{\partial x} + B \frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

で置き換えることによって高速化手法を適用できる。同様に、フォークト線形からのずれが  $K(x, y) f(x)$  の形で表わせる場合は、

【数 1 9】

$$\tilde{K}(x, y) = K(x, y) f(x)、$$

【数 2 0】

$$\frac{\partial \tilde{K}(x, y)}{\partial x} = \frac{\partial K(x, y)}{\partial x} f(x) + K(x, y) \frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

で置き換えることによって高速化手法を適用できる。

【0 0 2 6】

上記の補正方法を具体的な実施例で説明すると、サブローレンツィアン補正に対しては

【数 2 1】

$$K(x, y)$$

【数 2 2】

$$\frac{\partial K(x, y)}{\partial x}$$

はそれぞれ、

【数 2 3】

$$\tilde{K}(x, y) = K(x, y) A \exp(-B |x|)、$$

【数 2 4】

$$\frac{\partial \tilde{K}(x, y)}{\partial x} = \frac{\partial K(x, y)}{\partial x} A \exp(-B |x|) + K(x, y) [-\operatorname{sgn}(x) A B \exp(-B |x|)]$$

となる。ここでA、Bは補正係数である。またsgn(x)は符号関数であることは当業者には既知である。

【0 0 2 7】

ラインミキシング補正に関しては次の関係、

【数 2 5】

$$\frac{\partial K(x, y)}{\partial x} = 2[yL(x, y) - xK(x, y)]$$

【数 2 6】

$$\frac{\partial L(x, y)}{\partial x} = 2\left[xL(x, y) + yK(x, y) - \frac{1}{\sqrt{\pi}}\right]$$

が成り立つことから、

【数 2 7】

$$K(x, y)$$

【数 28】

$$\frac{\partial K(x, y)}{\partial x}$$

はそれぞれ、

【数 29】

$$\tilde{K}(x, y) = AK(x, y) + BL(x, y),$$

【数 30】

$$\frac{\partial \tilde{K}(x, y)}{\partial x} = -2 \left[ (Ax + By)K(x, y) - (Ay - Bx)L(x, y) - \frac{B}{\sqrt{\pi}} \right],$$

である。

ここで  $L(x, y)$  は次式で定義される、複素数  $z = x + iy$  の関数  $w(z)$  の虚数成分である。実数部分はフォークト関数である。

【数 31】

$$w(z) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-t^2)}{z - t} dt = \exp(-z^2) \operatorname{erfc}(-iz) = K(x, y) + iL(x, y)$$

$\operatorname{erfc}(z)$  は複素相補誤差関数である。

【0028】

以上のように本発明の計算方法によってフォークト関数を用いたライン・パイ・ライン計算を精度良く高速に実行することができる。さらにこれらの方法をコンピュータプログラムとして実装することにより、具体的な装置を実現することができる。このプログラムは例えばパーソナルコンピュータ上で動作するスタンドアロン型のプログラムでも良い。また他のソフトウェアのプラグインとして実現することもできる。

【図面の簡単な説明】

【0029】

【図 1】 図 1 はフォークト関数を概略的な図である。

【図 2】 図 2 は本発明の方法において、フォークト関数をサブ関数に分解する様子を示した図である。

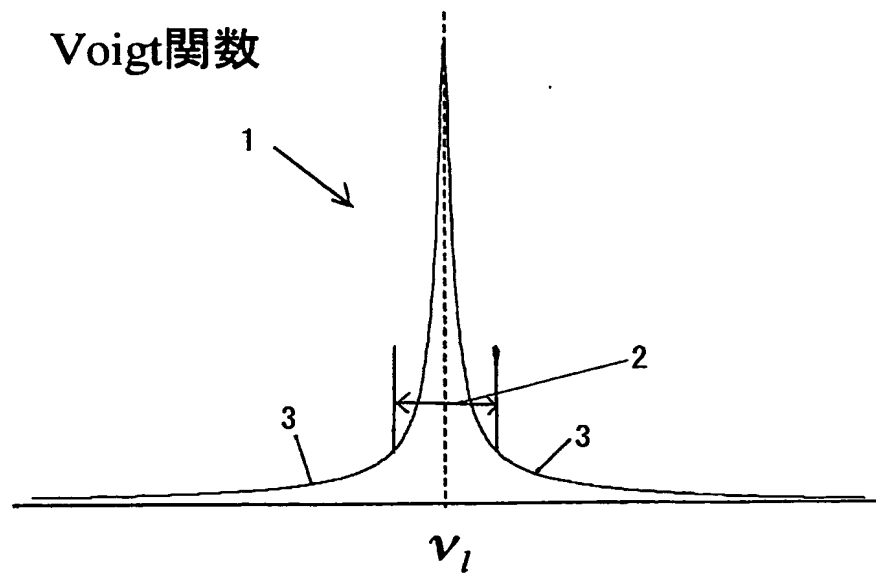
【図 3】 図 3 はフォークト関数と 3 次関数の誤差を示した図である。

【符号の説明】

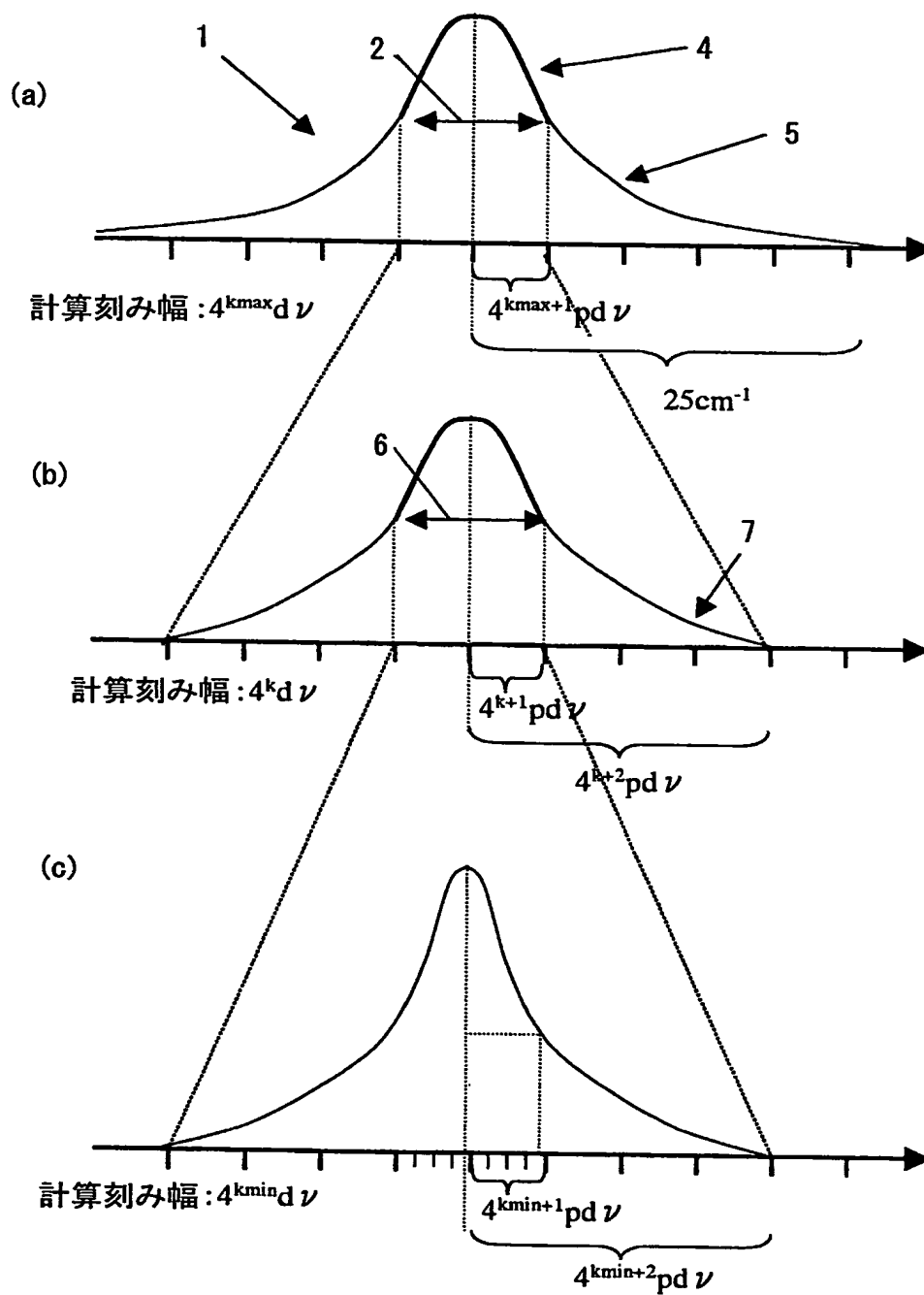
【0030】

- 1 フォークト関数
- 2 第 1 の範囲
- 3 裾部分
- 4 第 1 の範囲に含まれる関数
- 5 第 1 の範囲に含まれない部分

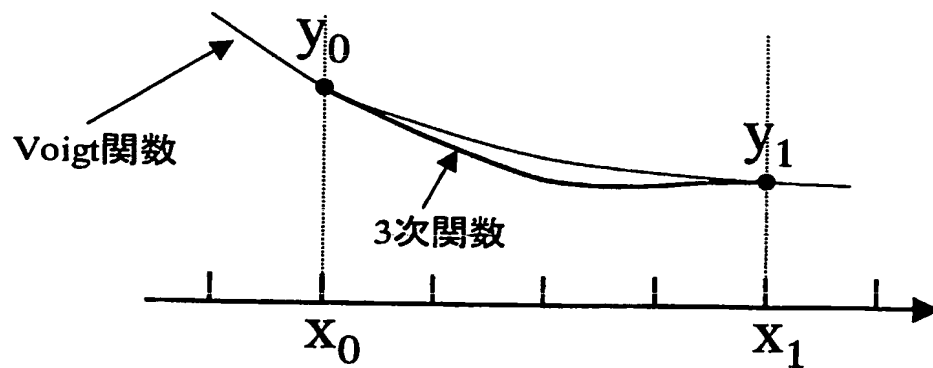
【書類名】 図面  
【図 1】



【図 2】



【図 3】





**【書類名】 要約書****【要約】****【課題】**

フォークト関数を用いたライン・バイ・ライン計算において従来よりも 5 0 ～ 1 0 0 倍高速に計算できる計算方法及びプログラムを提供する。

**【解決手段】**

フォークト関数をピーク近傍の第 1 の範囲と、該第 1 の範囲に含まれない裾部分とに分け、該第 1 の範囲を 3 次関数で置き換え、該裾部分をフォークト関数として等間隔の所定の範囲で計算する。さらに第 1 の範囲のピーク近傍を 3 次関数で置き換え、裾部分をフォークト関数と 3 次関数の差の関数として前記第 1 の所定の間隔よりせまい第 2 の所定の間隔で計算する。これを所望の精度になるまで繰り返す。また、これら所定の間隔の間を 4 または 5 分割する補間を行う。

**【選択図】 図 2**

## 認定・付加情報

|         |                |
|---------|----------------|
| 特許出願の番号 | 特願 2003-342605 |
| 受付番号    | 50301623588    |
| 書類名     | 特許願            |
| 担当官     | 第一担当上席 0090    |
| 作成日     | 平成15年10月 6日    |

## &lt;認定情報・付加情報&gt;

|       |             |
|-------|-------------|
| 【提出日】 | 平成15年 9月30日 |
|-------|-------------|

特願 2 0 0 3 - 3 4 2 6 0 5

出 願 人 履 歴 情 報

識別番号 [ 5 9 1 1 0 6 8 6 4 ]

|          |                     |
|----------|---------------------|
| 1. 変更年月日 | 1 9 9 7 年 9 月 1 2 日 |
| [変更理由]   | 住所変更                |
| 住 所      | 東京都江東区青海 2 丁目 4 5 番 |
| 氏 名      | 富士通エフ・アイ・ピー株式会社     |